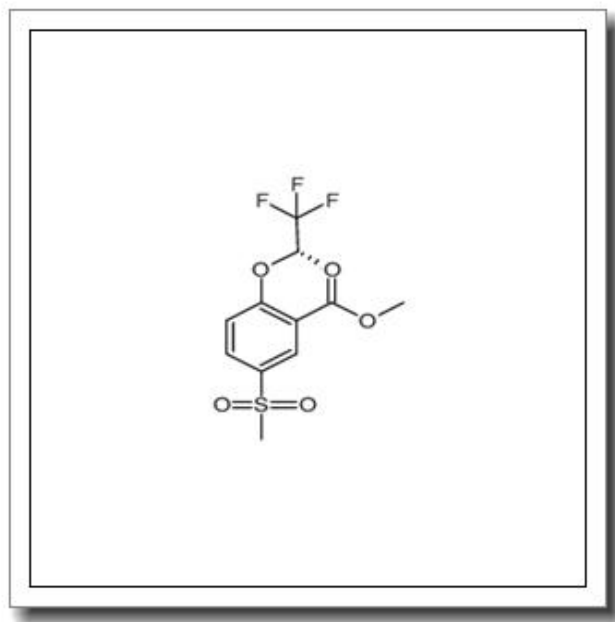


5-Methanesulfonyl-2-((S)-2,2,2-trifluoro-1-methyl-ethoxy)-benzoic acid methyl ester

5-Methanesulfonyl-2-((S)-2,2,2-trifluoro-1-methyl-ethoxy)-benzoic acid methyl ester



产品基本信息

属性	值
化学名称	5-Methanesulfonyl-2-((S)-2,2,2-trifluoro-1-methyl-ethoxy)-benzoic acid methyl ester
中文名称	5-Methanesulfonyl-2-((S)-2,2,2-trifluoro-1-methyl-ethoxy)-benzoic acid methyl ester
CAS 号	845617-20-1
分子式	C12H13F3O5S
分子量	326.289
纯度	≥96%

产品说明

1. 产品概述与化学特性

5-Methanesulfonyl-2-((S)-2,2,2-trifluoro-1-methyl-ethoxy)-benzoic acid methyl ester (CAS 号: 845617-20-1) 是一种有机硫化合物, 分子式为 $C_{12}H_{13}F_3O_5S$, 分子量为 326.289。该化合物具有苯甲酸甲酯骨架, 并在苯环上连接有甲磺酰基和(S)-2,2,2-三氟-1-甲基乙氧基官能团。其高纯度 ($\geq 96\%$) 确保了其在研究和工业应用中的可靠性。该化合物在常温下为白色至类白色固体, 需避光保存以避免降解。

2. 生物化学功能与重要性

该化合物因其独特的结构特征, 在生物化学领域表现出显著的活性。甲磺酰基和三氟甲基的引入增强了其电子亲和性和代谢稳定性, 使其在药物化学中作为中间体或活性分子具有重要价值。其(S)-构型进一步提高了对特定生物靶点的选择性, 可能用于手性药物开发或酶抑制研究。

3. 主要应用领域与具体用途

该产品广泛应用于医药研发和有机合成领域。在药物开发中, 它可作为关键中间体用于合成具有抗炎、抗肿瘤或中枢神经系统活性的候选化合物。此外, 其结构中的三氟甲基和甲磺酰基使其成为研究蛋白质-配体相互作用的理想模型分子。在材料科学中, 也可能用于功能性材料的修饰。

4. 储存条件与使用建议

建议将本品置于 $-20^{\circ}C$ 的干燥环境中保存, 避免与湿气和光线接触。开封后需充入惰性气体(如氮气)以延长稳定性。使用时应在通风良好的实验室环境中操作, 避免直接吸入或皮肤接触。溶解性测试表明其易溶于二甲基亚砜(DMSO)和部分有机溶剂, 推荐使用前进行溶解度筛选。

5. 质量控制与安全信息

本产品通过HPLC和NMR严格检测, 纯度 $\geq 96\%$ 。安全数据表明, 该化合物可能对眼睛和皮肤有刺激性, 操作时需佩戴防护手套和护目镜。若不慎接触, 应立即用大量

清水冲洗并就医。废弃物应按照当地法规处理，避免环境污染。详细安全信息请参考提供的材料安全数据表（MSDS）。